

02; 07

© 1991 г.

ЧЕТЫРЕХЧАСТОТНОЕ ПЕРИОДИЧЕСКОЕ КОЛЕБАНИЕ ФУНКЦИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЛИНИИ 4416 Å В СИСТЕМЕ $H^+ + Cd$

Ю. А. Ксаверий

Рассматривается функция возбуждения линии 4416 Å, наблюдаемая при соударениях $H^+ + Cd$. Экспериментальные данные по этой линии анализируются в качественном и количественном отношении. Особое внимание уделяется применяемой при этом технике обработки экспериментальных данных, которая обладает существенной новизной. Обработка производится, в частности, с использованием метода наименьших квадратов. Найдено, что сложная структура на функции возбуждения линии 4416 Å в системе $H^+ + Cd$ образована интерференционным наложением четырех монохроматических колебаний косинусоидального типа на фоне определенной плавной составляющей. Эмпирические частоты монохроматических колебаний отождествляются с площадями замкнутых участков на модельной квазимолекулярной сети горизонтального лестничного типа. Впервые обнаружено, что одна из частот является комбинационной и соответствует объединению двух элементарных замкнутых участков.

Введение

Начиная с семидесятых годов в различных исследовательских лабораториях мира накоплено довольно много преимущественно экспериментальной информации по интерференционным эффектам в процессах медленных столкновений тяжелых частиц. Внешнее проявление этих эффектов состоит в наличии более или менее сложной структуры на наблюдаемых в эксперименте величинах: функциях возбуждения, дифференциальном сечении, полном интегральном сечении. Последние носят не гладкий, плавный характер, а содержат многочисленные локальные экстремумы: минимумы, максимумы, явные изломы. Очевидно, что подобная сложная структура необъяснима и неинтерпретируема в рамках простых двухуровневых приближений, которые приводят к плавным зависимостям сечений от энергии соударения с четким порогом, одним максимумом и медленным спадом в области больших энергий.

Ключ к расшифровке сложной структуры большинства наблюдаемых сечений был найден благодаря благоприятному обстоятельству: в эксперименте обнаружилось, что полные сечения возбуждения ряда спектральных линий (линий 3888 и 4713 Å) в системе $He^+ + He$ носят на удивление периодический характер с эквидистантностью положений локальных экстремумов в масштабе обратной скорости соударения [1, 2]. Сечение фактически содержит одночастотное периодическое колебание типа синуса или косинуса на некотором плавно меняющемся фоне. Объяснение этому феномену дала идея о квазимолекулярной интерференции [3-5]. Соответствующая модель вошла в литературу под названием модели Розенталя—Бобашева. Модель апеллирует к трем взаимодействующим термам, образующим специфическую сеть с замкнутым участком вытянутой треугольной формы. Осцилляции возникают по причине когерентного заселения в области малых межъядерных расстояний двух близких возбужденных состояний квазимолекулы с последующим взаимодействием их между собой на больших межъядерных расстояниях и возникновении связанных с этим альтернатив при обходе замкнутого участка на пути в конечное возбужденное состояние. При этом частота осцилляций прямо пропорциональна площади замкнутого участка, а сами колебания эквидистантны в масштабе обратной скорости соударения.

Двухчастотные периодические осцилляции впервые были обнаружены в Ужгородском государственном университете в Проблемной лаборатории физики электронных столкновений. Соответствующие экспериментальные исследования связаны с изучением систем $Mg^+ + Rb$ и $Mg^+ + Cs$: при энергиях 20—500 эВ столкновения однозарядных ионов магния с атомами рубидия и цезия на функции возбуждения линии 5184 \AA (MgI) было обнаружено два периода регулярного следования локальных экстремумов [6]. Интерпретация этих фактов возможна в рамках обобщения модели Розенталя—Бобашева на случай сети взаимодействующих термов, состоящей как минимум из четырех уровней.

В плане настоящей работы целесообразно упомянуть об оптических, с высоким разрешением исследованиях возбуждения ряда уровней гелия и неона в системе $He^+ + Ne$ в области энергий 30 эВ—2 кэВ [7]. С целью выявления осцилляционной структуры сечения возбуждения 3^1P -уровня атома Ne производились прецизионные измерения только относительного сечения. Разбор данных по интенсивностям высвечивания линии перехода 3^1P-2^1S как при наличии поляризатора, так и без него свидетельствует о наличии большого числа осцилляций типа Розенталя—Бобашева. Анализ показал, что в полном сечении возбуждения состояния 3^1P (HeI) на фоне медленных осцилляций Розенталя—Бобашева привычного типа (с частотами, эквивалентными площадям замкнутых участков $\langle \Delta U \Delta R \rangle \sim 9.0 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$) наблюдаются быстрые осцилляции неведомой природы (с частотами, эквивалентными большим площадям $\langle \Delta U \Delta R \rangle \sim \sim 1000 \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$). Амплитуды этих быстрых осцилляций порядка двух процентов. На интервале 100—220 эВ обнаружены три частоты. Это дает основание говорить о трехчастотном периодическом колебании в указанном интервале энергий соударения.

Более тщательные измерения зависимости интенсивности свечения линии 5016 \AA в системе $He^+ + Ne$ привели к обнаружению четырех различных осцилляций типа Розенталя—Бобашева в полном сечении σ [8]. Техника получения данных об осцилляциях из данных по сечениям состояла в построении графика зависимости полной фазы колебаний от обратной скорости вылетающих ионов. На первом этапе было найдено несколько серий эквидистантных минимумов и максимумов, которые нумеровались числами натурального ряда 1, 2, ... На втором этапе для каждой серии по методу наименьших квадратов строилась соответствующая прямая

$$N = N_0(1/v) = \frac{1}{h} \langle \Delta u \Delta R \rangle / v + N_0 / 2\pi,$$

где N_0 — начальная фаза, N — полная фаза осцилляций.

По наклонам прямых определялись площади $\langle \Delta U \Delta R_i \rangle$ замкнутых петель на схеме термов (она не конкретизировалась), а по точкам пересечения с осью ординат — начальные фазы N_0 . Результаты работы [8] для полного сечения следующие: $\langle \Delta U \Delta R \rangle_1 = (8.9 \pm 0.4) \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$ (интервал 35—120 эВ), $\langle \Delta U \Delta R \rangle_2 = (27 \pm 1.4) \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$ (интервал 38—52 эВ), $\langle \Delta U \Delta R \rangle_3 = (12.0 \pm 0.2) \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$ (интервал 69—1737 эВ), $\langle \Delta U \Delta R \rangle_4 = (9.6 \pm 0.4) \text{ эВ} \cdot \text{\AA}$ (интервал 100—1200 эВ). Так что с известными оговорками можно говорить о четырехчастотном колебании функции возбуждения линии 5016 \AA в системе $He^+ + Ne$.

Даже по этим немногим работам вырисовываются контуры нового и перспективного направления исследований в физике атомных столкновений, так сказать спектроскопии колебаний сечения взаимодействия, основной задачей которого является определение спектрального состава осцилляций функции возбуждения, сечений конкретных процессов и интерпретация этих спектров. Результатом исследований в этом направлении является получение информации фундаментального характера о квазимолекулярных константах, так как площади замкнутых участков на сети термов несут на себе печать единственности, уникальности и неповторимости конкретных квазимолекулярных систем, им одним присущую специфику. Это прямые двумерные аналоги одномерных атомных констант — расстояний между уровнями изолированных частиц, которые, как известно, однозначно связаны с длинами спектральных линий переходов.

В теоретическом плане подобные исследования связаны с изучением многоуровневых квазимолекулярных сетей. Перспективным представляется использование импульсного пространства с его простотой и наглядностью: траекториям в этом представлении соответствует ряд окружностей, а сети — совокупность огибающих этих окружностей, что позволяет непосредственно обращаться к геометрическим образам и методам при описании рассеяния [9].

В свете сказанного достаточно естественной выглядит основная цель настоящей работы — проанализировать экспериментальные данные по сечениям возбуждения линии 4416 \AA при столкновениях $\text{H}^+ + \text{Cd}$ и показать, что сложная структура сечения в первом приближении представляет собой периодическое колебание с четырьмя различными частотами. Поскольку применяемый метод обработки экспериментальных данных существенно отличается от описанных в литературе, в том числе и в цитированных работах, то основной акцент делается на технической стороне дела.

1. Качественные особенности функции возбуждения ионной линии кадмия

Спектральная линия 4416 \AA соответствует переходу $4d^9 5s^2 2D_{3/2} - 4d^{10} 5p^2 P_{3/2}$ в ионе кадмия CdII . При столкновениях протонов низких энергий (интервал $0-1500 \text{ эВ}$ в лабораторной системе) с атомами кадмия интенсивность свечения

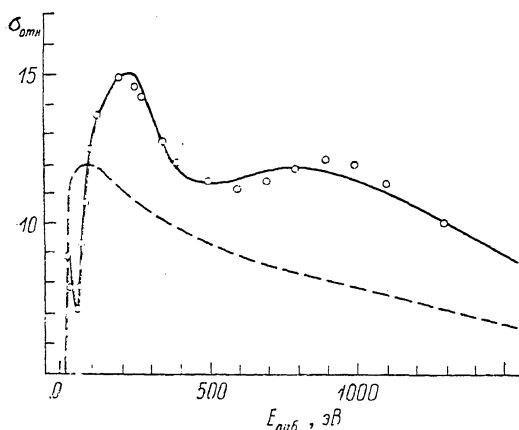


Рис. 1. Зависимость сечения возбуждения линии 4416 \AA в системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$ от энергии.

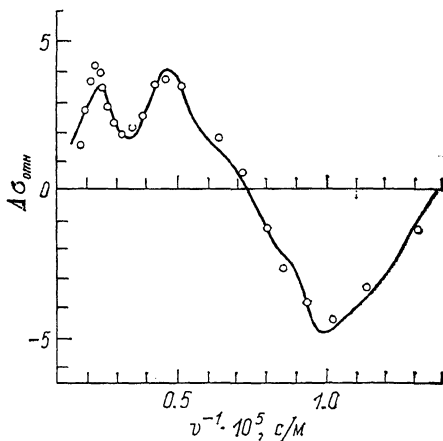


Рис. 2. Осцилляции функции возбуждения линии 4416 \AA в системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$.

этой линии обнаруживает структуру, слегка напоминающую вид функции возбуждения линии 2144 \AA в той же системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$ [10]. На рис. 1 здесь заново воспроизведены экспериментальные данные (кружки), заимствованные из работы [10], рассматривая которые, можно получить некоторое наглядное представление о структуре функции возбуждения как зависимости относительного сечения $\sigma_{отн}$ от энергии соударения $E_{лаб}$ в лабораторной системе отсчета. Можно отметить следующие качественные особенности наблюдаемой в эксперименте зависимости: 1) порог реакции 7 эВ ; 2) чрезвычайно крутой рост сечения непосредственно у порога реакции (при энергии $E_{лаб} = 10 \text{ эВ}$ сечение почти достигает половины своего максимального значения); 3) абсолютный максимум сечения достигается при $E_{лаб} = 200 \text{ эВ}$ и равен $1.62 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$; 4) структура состоит из трех локальных максимумов при $E_{лаб} = 40, 200, 900 \text{ эВ}$ и двух локальных минимумов при $E_{лаб} = 50, 600 \text{ эВ}$; 5) расстояния Δ , между значениями соседних локальных экстремумов образуют явно немонотонную последовательность $0.75, 7.725, 3.6, 0.825$ отн. ед. сечения.

Можно ли получить количественное воспроизведение этих особенностей функции возбуждения линии 4416 \AA ?

2. Техника численного эксперимента

Несмотря на относительно небольшое число локальных экстремумов в экспериментально наблюдаемом сечении возбуждения линии 4416 Å при столкновениях $H^+ + Cd$, соответствующая функциональная зависимость при ближайшем рассмотрении оказывается крайне нетривиальной. К примеру, можно допустить на миг, что плавная часть сечения (некая ландау-зинеровская кривая) проходит примерно посередине между соседними экстремумами, представляя собой усреднение по осцилляциям. Это вполне естественное предположение. Но увы, если построить соответствующий график зависимости экспериментального отклонения сечения

$$\Delta\sigma_{отч}^{эксп} = \sigma_{отч}^{эксп} - \sigma_{отч}^{лз}$$

от обратной скорости $1/v$ налетающих протонов (типа того, что показан на рис. 2) при каком-нибудь выборе ландау-зинеровских параметров (но при условии, что кривая $\sigma_{отч}^{лз} = \sigma_{отч}^{лз}(1/v)$ представляет собой примерно усредненное сечение), то результат неизменно будет один и тот же — явная, очевидная неперриодичность колебаний отклонения сечения. Так, при значениях амплитуды $A=61.2$, расщепления термов $a=30$ эВ, «пороговой энергии» $E_n=7$ эВ для ландау-зинеровских параметров возникает характерная картина — слишком явное увеличение периода колебаний с ростом обратных значений скорости налетающего протона, состоящее в том, что с каждым последующим положительным или отрицательным всплеском наблюдаемого сечения период колебаний примерно удваивается. В принципе такая ситуация вполне допускает интерпретацию в свете работы [11], специально посвященной объяснению теоретически возможных причин нарушения эквидистантности осцилляций в сечениях возбуждения. Но в применении к описанию конкретной ситуации немаловажную роль играют многие обстоятельства: и принцип простоты описания, и отлаженность методики, и возможности применяемой техники. К тому же при обращении к нетрадиционному методу описания конкретного явления, при интерпретации его как чего-то нехарактерного, исключительного, особенного в обязательном порядке необходимо ответить на вопрос, почему при столкновениях одних и тех же частиц в области примерно одних и тех же энергий функции возбуждения одних спектральных линий гармонически осциллируют, а сечения возбуждения других содержат нарушения эквидистантности. В применении к рассматриваемому процессу и в плане настоящей работы апология идеи периодических осцилляций представляется проще и естественней идеи ангармоничности. Но последнюю, разумеется, не следует терять из виду.

Описание наблюдаемой в эксперименте зависимости для функции возбуждения линии 4416 Å в системе $H^+ + Cd$ с эксплуатацией идеи периодических осцилляций оказывается успешным на следующем пути. Ключевой нетривиальный момент состоит в отказе от требования приблизительного совпадения плавной части сечения (ландоу-зинеровской кривой) и усредненного по всем локальным колебаниям экспериментального сечения. По существу в подобном отказе нет крамолы, так как речь идет лишь о небольшом конечном «окне» шириной 10—1500 эВ, сквозь которое наблюдалось сечение. На бесконечном интервале энергий соударения плавная часть сечения и усредненное сечение, очевидно, обязаны совпадать, но никак не на конечном интервале, сколь бы большим он ни казался.

Пусть для определенности ландау-зинеровская кривая $\sigma_{отч}^{лз} = \sigma_{отч}^{лз}(E_{лаб})$ определяется параметрами $A=54.3$, $a=15$ эВ, $E_n=7$ эВ (экспериментальный порог). При энергиях $E_{лаб} > 100$ эВ кривая с такими параметрами в целом проходит ниже основной массы экспериментальных точек, примерно так, как показано штриховой кривой на рис. 1. При этом разностная зависимость $\Delta\sigma_{отч}^{эксп} = \Delta\sigma_{отч}^{эксп}(1/v)$ для данных эксперимента имеет вид, подобный зависимости на рис. 2. Можно предположить, что структура этой зависимости обусловлена интерференционным взаимодействием (формально наложением) целого ряда гармонических колебаний. В первом приближении это два колебания: одно низкочастотное (с большим периодом), а другое высокочастотное (с малым

периодом). Теперь низкочастотное колебание имеет переменную амплитуду в области малых значений обратной скорости $v^{-1} \sim 0.3-0.4 \cdot 10^{-5}$ с/м амплитуда примерно в два раза меньше, чем в области больших значений $v^{-1} \sim 1.0 \cdot 10^{-5}$ с/м. Простейшим способом добиться такого эффекта можно, если предположить, что низкочастотное колебание в действительности состоит из двух близких по частоте монохроматических осцилляций (т. е. имеет дублетный характер), которые создают интерференционные биения с максимумом предположительно в области больших v^{-1} . Далее, относительно высокочастотной составляющей колебания можно предположить, что ее период и амплитуда определимы из данных в области малых значений v^{-1} , где эти осцилляции явно видны и хорошо очерчены большим числом экспериментальных точек. Но если эти осцилляции проэкстраполировать в область больших v^{-1} , то немедленно обнаружится кажущееся противоречие: уже при $v^{-1} \sim 0.6-0.8 \cdot 10^{-5}$ с/м высокочастотные осцилляции явно «исчезают», а при еще больших обратных скоростях, если и возникают, то в противофазе с едва различимыми колебаниями экспериментальных точек. Таким образом, выходит, что и высокочастотное колебание в действительности имеет дублетный характер: оно состоит из двух близких по амплитуде и по частоте монохроматических осцилляций, причем различие в частотах такое, что результирующие интерференционные биения максимальны при $v^{-1} \lesssim 0.5 \cdot 10^{-5}$ и $\gtrsim 1.0 \cdot 10^{-5}$ с/м.

Сказанное резюмируется следующей формулой для сечения аппроксимации:

$$\sigma_{\text{отн}}^{\text{анпр}} = \sigma_{\text{отн}}^{\text{нч}}(E; A, a, E_{\text{н}}) + \Delta\sigma_1^{\text{очп}} + \Delta\sigma_2^{\text{очп}},$$

где E — энергия в СЦМ, а НЧ и ВЧ колебания соответственно

$$\Delta\sigma_1^{\text{очп}} = B_1 \cos \pi(\beta_1/v - \delta_1) + B_2 \cos \pi(\beta_2/v - \delta_2),$$

$$\Delta\sigma_2^{\text{очп}} = B_3 \cos \pi(\beta_3/v - \delta_3) + B_4 \cos \pi(\beta_4/v - \delta_4).$$

Здесь B_i , β_i , δ_i — амплитуды, удвоенные частоты и постоянные фазовые сдвиги составляющих монохроматических колебаний. Для проверки правильности идеи необходимо иметь численные значения всех параметров в формуле аппроксимации. Пусть вначале для простоты амплитуды, частоты и фазы равны или примерно равны $B_1 = B_2$, $B_3 = B_4$, $\beta_1 = \beta_1^* + \delta\beta_1$, $\beta_2 = \beta_1^* - \delta\beta_1$, $\delta\beta_1 < \beta_1^*$, $\beta_3 = \beta_3^* + \delta\beta_3$, $\beta_4 = \beta_3^* - \delta\beta_3$, $\delta\beta_3 < \beta_3^*$, $\beta_1^* < \beta_3^*$. Знак $<$ здесь означает различие в несколько раз по абсолютной величине. В таком случае осциллирующие добавки приобретают вид

$$\Delta\sigma_1^{\text{очп}} = 2B_1 \cos \pi(\beta_1^*/v - (\delta_1 + \delta_2)/2) \cos \pi(\delta\beta_1/v - (\delta_1 - \delta_2)/2),$$

$$\Delta\sigma_2^{\text{очп}} = 2B_2 \cos \pi(\beta_3^*/v - (\delta_3 + \delta_4)/2) \cos \pi(\delta\beta_3/v - (\delta_3 - \delta_4)/2).$$

Фигурирующие здесь параметры нетрудно найти из данных эксперимента последовательно: вначале для низкочастотного, а затем для высокочастотного.

НЧ колебание. Фактически видно два полупериода: положительный и отрицательный. Положительный имеет максимум 2.8 отн. ед. при $v^{-1} = 0.34 \times 10^{-5}$ с/м. Отрицательный имеет максимум 4.2 при $v^{-1} \approx 1.14 \cdot 10^{-5}$ с/м. Кроме того, имеется нуль быстро меняющейся частоты НЧ колебания при $v^{-1} \approx 0.74 \times 10^{-5}$ с/м. Наконец, можно положить, что максимум биений НЧ колебаний реализуется при $v^{-1} = 1.14 \cdot 10^{-5}$ с/м. Этим характерным точкам на экспериментально наблюдаемой зависимости соответствуют следующие уравнения: $\beta_1^* = 2/T_1 = 1.25 \cdot 10^5$ м/с для частот, так как «расстояние» между соседними экстремумами есть $1.14 - 0.34 \cdot 10^{-5}$ с/м и дает половину периода T_1 НЧ колебания; $\pi(\beta_1^* \cdot 0.74 \cdot 10^{-5}$ с/м $- (\delta_1 + \delta_2)/2) = (\pi/2)(1 + 4n)$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ для фаз; $2B_1 = 4.2$ для амплитуды; $\pi(\delta\beta_1 \cdot 1.14 \cdot 10^{-5}$ с/м $- (\delta_1 - \delta_2)/2) = 2\pi m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ и $2B_1 \cos \pi(\delta\beta_1 \cdot 0.34 \cdot 10^{-5}$ с/м $- (\delta_1 - \delta_2)/2) = 2.8$ для разности фаз и девиации частоты $\delta\beta_1$. При $n = m = 0$ система численных уравнений легко решается, что дает $\delta\beta_1 = 0.33 \cdot 10^5$ м/с, $(\delta_1 + \delta_2)/2 = 0.42$, $(\delta_1 - \delta_2)/2 = 0.38$. Тем самым все параметры низкочастотного колебания полностью определены.

ВЧ колебание. Привязка к данным эксперимента делается следующим образом. Период T_2 быстрой компоненты ВЧ колебания приблизительно определяется положениями первых двух локальных максимумов отклонения сече-

ния в масштабе обратной скорости соударения $T_2 = 0.48 - 0.22 \cdot 10^{-5}$ с/м. Амплитуда B_3 ВЧ колебаний равна примерно половине разности между соседними экстремумами на экспериментально наблюдаемой зависимости и может быть оценена величиной 0.8 отн. ед. Период медленно меняющейся компоненты ВЧ колебания $\sim 2 \cdot 10^{-5}$ с/м. Максимум биений имеет место при $v^{-1} = 0.24 \cdot 10^{-5}$ с/м. Тем самым привязка сделана. Формально $\beta_3^* \equiv 2/T_2 = 7.7 \cdot 10^5$ м/с; $\delta\beta_3 = 1 \cdot 10^5$ м/с; $\pi(\beta_3 \cdot 0.35 \cdot 10^{-5}$ с/м $- (\delta_3 + \delta_4)/2) = \pi + 2\pi n$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; $\pi(\delta\beta_3 \cdot 0.24 \times 10^{-5}$ с/м $- (\delta_3 - \delta_4)/2) = 0 + 2\pi m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. При $n = m = 0$ получается, что $(\delta_3 + \delta_4)/2 = 1.70$, $(\delta_3 - \delta_4)/2 = 0.24$. Тем самым все параметры высокочастотного колебания оценены.

Все вместе выглядит так: $A \approx 54.3$, $a \approx 15$ эВ, $E_\pi \approx 7$ эВ, $B_1 \approx 2.1$, $\beta_1 \approx 1.58 \times 10^5$ м/с, $\delta_1 \approx 0.80$, $B_2 \approx 2.1$, $\beta_2 \approx 0.92 \cdot 10^5$ м/с, $\delta_2 \approx 0.04$, $B_3 \approx 0.80$, $\beta_3 \approx 8.70 \times 10^5$ м/с, $\delta_3 \approx 1.94$, $B_4 \approx 0.80$, $\beta_4 \approx 6.70 \cdot 10^5$ м/с, $\delta_4 \approx 1.46$. Сечение аппроксимации с такими значениями модельных параметров прекрасно воспроизводит все качественные особенности (см. раздел 1) наблюдаемой в эксперименте структуры функции возбуждения линии 4416 Å в системе $H^+ + Cd$. Соответствующие кривые здесь не показаны, но они аналогичны сплошным линиям на рис. 1 и 2. Тем самым гипотеза о четырехчастотном периодическом колебании рассматриваемой функции возбуждения приобретает реальные очертания. Некоторый субъективизм в численных оценках при привязке к данным можно устранить посредством дальнейшей обработки по методу наименьших квадратов.

Тест на оптимальность 15 параметров аппроксимации осуществлялся на ЭВМ «Электроника 100/И» вначале в диалоговом режиме по программе, составленной на языке FOCAL-1973 [12, 13]. Тест «вручную» подтвердил правильность предварительных оценок и позволил слегка уточнить положение искомого минимума взвешенного среднеквадратичного отклонения. Для последнего с весом 16 (по числу учитываемых при обработке точек) за 226 малых итерационных шагов (или разовых вычислений среднеквадратичного отклонения) достигнуто значение 0.21058.

Численный эксперимент по дальнейшему уточнению параметров аппроксимации был продолжен на той же вычислительной машине, но уже в полностью автоматическом режиме. Для работы использовалась программа безусловной локальной минимизации функции 15 аргументов (по числу модельных параметров), написанная на языке EXPRO-77 (расширенный вариант языка FOCAL). За один большой итерационный шаг производилось 45 вычислений взвешенного среднеквадратичного отклонения и осуществлялся разовый по координатный спуск к минимуму по всем 15 переменным $A, a, E_\pi, (B_i, \beta_i, \delta_i)_i$, $i = 1, 2, 3, 4$. Время прохождения одного большого итерационного шага ~ 45 мин. За 43 больших итерационных шага (примерно 31 ч чистого машинного времени счета) найдены следующие значения для параметров аппроксимации: $A = 53.10$, $a = 15.12$ эВ, $E_\pi = 3.766$ эВ, $B_1 = 2.570$, $\beta_1 = 1.726 \cdot 10^5$ м/с, $\delta_1 = 0.8529$, $B_2 = 1.810$, $\beta_2 = 0.9434 \times 10^5$ м/с, $\delta_2 = 0.05964$, $B_3 = 0.9986$, $\beta_3 = 8.613 \cdot 10^5$ м/с, $\delta_3 = 1.812$, $B_4 = 0.9429$, $\beta_4 = 7.495 \cdot 10^5$ м/с, $\delta_4 = 1.936$, которые можно считать весьма близкими к оптимальным. При этом достигнутое значение взвешенного (с весом 22 по числу учитываемых при обработке точек) среднеквадратичного отклонения $Y \approx 0.1072$, что соответствует точности $(\sqrt{Y}/\sigma_{\max}^{\text{вкл}}) \times 100\% = 2.205\%$ воспроизведения данных эксперимента на уровне абсолютного максимума наблюдаемого сечения $\sigma_{\text{отн}}^{\text{вкл}}$. Результаты расчетов оптимальных кривых сечения аппроксимации $\sigma_{\text{отн}}^{\text{анлр}} = \sigma_{\text{отн}}^{\text{анлр}}(E_{\text{лаб}})$ (сплошная линия), ландау-зинеровской кривой $\sigma_{\text{отн}}^{\text{лз}} = \sigma_{\text{отн}}^{\text{лз}}(E_{\text{лаб}})$ (пунктир) и осциллирующего отклонения сечения $\Delta\sigma_{\text{отн}} = \Delta\sigma_{\text{отн}}(1/v)$ (сплошная линия) показаны на рис. 1, 2.

Таким образом, прогресс в аналитическом описании структуры на функции возбуждения линии 4416 Å в системе $H^+ + Cd$ достигается на традиционном пути: эта структура в первом приближении представляет собой наложение плавной ландау-зинеровской кривой и двух двухчастотных осциллирующих по закону простого косинуса кривых. Как видно, данная структура с большой степенью точности интерпретируется как зависимость с периодическими осцилляциями. Осцилляциями охвачен интервал энергий $30 \leq E \leq 1487$ эВ (или интервал обратных скоростей соударения $0.186 \cdot 10^5$ с/м $\leq v^{-1} \leq 1.134 \cdot 10^5$ с/м). На уровне

максимума плавной части сечения ($E_{1a6} \approx 80$ эВ) глубина модуляции $M = (B_1 + B_2 + B_3 + B_4) / \sup \sigma_{отн}^{пл} = 52.69\%$. Оптимальным частотам, найденным в результате численного эксперимента, на сети квазимолекулярных термов соответствуют четыре замкнутых участка со следующими площадями: $\langle \Delta U \Delta R \rangle_1 = 3.525$ эВ·Å, $\langle \Delta U \Delta R \rangle_2 = 1.927$ эВ·Å, $\langle \Delta U \Delta R \rangle_3 = 17.59$ эВ·Å, $\langle \Delta U \Delta R \rangle_4 = 15.31$ эВ·Å. Но как идентифицировать эти площади с конкретными замкнутыми участками на сети термов?

3. Корреляционная диаграмма и гипотетическая сеть термов

Строго говоря, для ответа на вопрос об идентификации квазимолекулярных констант — эмпирических площадей $\langle \Delta U \Delta R \rangle_i$, необходимы последовательные расчеты термов из первых принципов теории. Это соответствует духу прямой задачи квантовой теории рассеяния. Но при движении вспять от конкретной

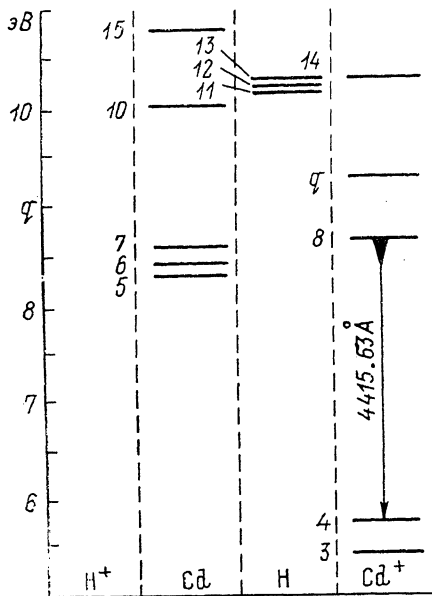


Рис. 3. Часть корреляционной диаграммы для системы $H^+ + Cd$ в окрестности уровня $4d^9 5s^2 2D_{3/2}$ ($CdII$).

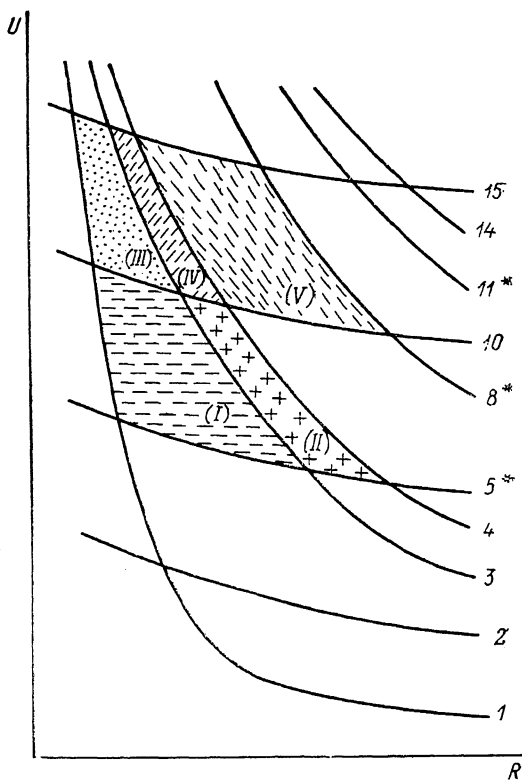


Рис. 4. Гипотетическая квазимолекулярная сеть для системы $H^+ + Cd$.

эмпирии к фундаментальным постоянным материи и свету теории в ходе решения обратных задач квантовой теории рассеяния вполне допустимы и оправданы реалистические гипотезы и модели. Эвристическая ценность последних несомненна. Кроме того, достигаются еще описание и интерпретация (пусть относительно верные и условные, но все же описание и интерпретация) прямых данных измерений. В конце концов принципы и положения, закладываемые в основу гипотез и моделей, носят явный характер и их всегда можно проверить в рамках более общих теорий либо на совместимость с другими принципами и положениями.

Гипотетическая сеть квазимолекулярных термов, позволяющая объяснить причины появления четырехчастотного периодического колебания на функции возбуждения линии 4416 Å в системе $H^+ + Cd$, с необходимостью должна удовлетворять по крайней мере следующим трем положениям: 1) сеть должна быть предельно простой, т. е. должна содержать возможно меньше термов и точек квазипересечений; 2) в пределе бесконечно больших межъядерных расстояний

квазимолекулярные термы должны асимптотически выходить на состояния изолированных атомов и ионов, образующих остов квазимолекулярного иона $(\text{HCd})^+$; 3) замкнутые участки сети должны совпадать с эмпирически найденными площадями $\langle \Delta U \Delta R \rangle_i$, в том числе и для функций возбуждения других спектральных линий системы $\text{H}^+ + \text{Cd}$.

Второе из перечисленных положений решается с помощью корреляционной диаграммы (рис. 3). На этой диаграмме уровни частиц, формирующих остов квазимолекулярного иона $(\text{HCd})^+$, определенным образом совмещены. За нуль отсчета на вертикальной шкале энергий условно выбирается суммарная энергия основных состояний атома HI и иона CdII . Уровни атома кадмия смещены вверх относительно этого нуля на величину дефекта энергии $\Delta E (\text{HCd})^+ = V_i (\text{H}) - V_i (\text{Cd}) = 4.605 \text{ эВ}$, где V_i — потенциал однократной ионизации. Каждая горизонтальная линия на корреляционной диаграмме на указанном интервале энергий (ниже 11 эВ) соответствует суммарной энергии частиц H^+ , Cd (в левой части диаграммы) и H , Cd^{*+} (в правой части диаграммы), где звездочка символизирует возбуждение. Нижние уровни в образовавшейся последовательности (в порядке возрастания) следующие: 1 — $E(1s^2S_{1/2}(\text{HI})) + E(4d^{10}5s^2S_{1/2}(\text{CdII}))$; 2 — $E(\text{H}^+) + E(4d^{10}5s^2S_0(\text{CdI}))$; 3, 4 — $E(1s^2S_{1/2}(\text{HI})) + E(4d^{10}5p^2P_{1/2, 3/2}(\text{CdII}))$; 5—7 — $E(\text{H}^+) + E(4d^{10}5s5p^3P_{0, 1, 2}(\text{CdI}))$; 8, 9 — $E(1s^2S_{1/2}(\text{HI})) + E(4d^95s^2\text{D}_{3/2, 5/2}(\text{CdII}))$; 10 — $E(\text{H}^+) + E(4d^{10}5s5p^1P_1^0(\text{CdI}))$; 11—13 — $E(2p^2P_{3/2}^0(\text{HI}), 2s^2S_{1/2}(\text{HI}), 2p^2P_{3/2}^0(\text{HI})) + E(4d^{10}5s^2S_{1/2}(\text{CdII}))$; 14 — $E(1s^2S_{1/2}(\text{HI})) + E(4d^{10}6s^2S_{1/2}(\text{CdII}))$; 15 — $E(\text{H}^+) + E(4d^{10}5s6s^3S_1(\text{CdI}))$.

Первое и третье положения относительно гипотетической сети отражают общий в науке принцип необходимости достаточности, превышение которого при объяснении данных неразумно. Простейшим способом эти положения удовлетворяются следующим образом. Если считать, что остовы квазимолекулярных ионов $\text{H}^+ + \text{Cd}$ и $\text{H} + \text{Cd}^+$ относительно устойчивы (т. е. соответствующие термы не имеют взаимных пересечений между собой), то термы, выходящие на уровни $E(\text{H}^+ + \text{Cd}^*)$, с одной стороны, и термы, выходящие на уровни $E(\text{H}^* + \text{Cd}^+)$ или $E(\text{H} + \text{Cd}^{*+})$, с другой стороны, в целом имеют разные наклоны. В результате возникает сложная квазимолекулярная сеть с характерными элементарными ячейками четырехугольной формы. Эта сложная сеть несколько упрощается, если ограничиться учетом лишь первых 15 термов, асимптотика которых совпадает с перечисленными выше уровнями на корреляционной диаграмме. Дальнейшее упрощение достигается заменой дублетов 8, 9, а также триплетов 5—7 и 11—13 на некие эффективные термы 8^* , 5^* и соответственно 11^* , что оправдано ввиду близости энергий внутри мультиплетов. Таким образом, исходная сложная сеть квазимолекулярных термов редуцируется к сравнительно простой сети из 10 «термов», показанной на рис. 4. Выбранный масштаб вдоль координатных осей для энергии U и межъядерного расстояния R условный и по существу произвольный. Реальный ход термов может быть существенно иным. Принципиальный характер носит только топологическая эквивалентность реальной и условной сетей на рис. 4. Самой существенной особенностью гипотетической сети термов является наличие 5 элементарных замкнутых участков $(I) = (10, 3, 5^*, 1)$; $(II) = (10, 4, 5^*, 1)$; $(III) = (15, 3, 10, 1)$, $(IV) = (15, 4, 10, 3)$, $(V) = (15, 8^*, 10, 4)$. «Путь» из начального состояния 2 в конечное состояние 8 квазимолекулярного иона $(\text{HCd})^+$, как видно, содержит ряд альтернатив, связанных с обходом замкнутых участков (III) , (IV) и (V) . Отождествление замкнутых участков с эмпирическими площадями может быть, например, таким: $(III) - \langle \Delta U \Delta R \rangle_1$, $(IV) - \langle \Delta U \Delta R \rangle_2$, $(V) - \langle \Delta U \Delta R \rangle_4$, $(IV) + (V) - \langle \Delta U \Delta R \rangle_3$. Проверка: $17.59 \text{ эВ} = \langle \Delta U \Delta R \rangle_3 \approx \langle \Delta U \Delta R \rangle_2 + \langle \Delta U \Delta R \rangle_4 = 17.24 \text{ эВ}$. Таким образом, три из найденных эмпирических частот осцилляций отождествляются с элементарными замкнутыми участками сети термов, а одна является комбинационной и отождествляется с суммарной площадью двух элементарных замкнутых участков. Небольшой разброс в цифрах целиком может быть отнесен на счет грубости приближений при оценках.

Итак, сложная структура экспериментально наблюдаемой функции возбуждения линии 4416 \AA в системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$ с большой степенью достоверности представляет собой четырехчастотное периодическое колебание на плавном фоне обычной ландау-зинеровской кривой. Техника выявления периодической осцилляционной структуры основана на модельной обработке экспериментальных данных на ЭВМ с использованием метода наименьших квадратов. В отличие от известных методов параметры периодического колебания определяются не по видимым (кажущимся) положениям локальных экстремумов, фиксация которых сама несет на себе печать субъективизма и тем самым служит источником дополнительных погрешностей, а на основании всей полученной в эксперименте информации. Следует специально подчеркнуть, что в любой экспериментальной точке содержится ничуть не меньше информации об осцилляциях, чем в произвольно выбранном наборе таких точек, пусть даже являющихся локальными минимумами и максимумами. Так что применяемый метод представляет собой шаг вперед в техническом отношении.

Что касается интерпретации найденных эмпирических частот периодического колебания функции возбуждения линии 4416 \AA в системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$, то это становится возможным в рамках простейшей квазимолекулярной модели, основанной на сети из 15 термов. Но прямое отношение к появлению осцилляций имеют, по-видимому, лишь 6 термов, образующих сеть горизонтального лестничного типа с тремя элементарными замкнутыми участками. Эмпирические частоты осцилляций отождествляются с площадями этих замкнутых участков. Интерпретация одной из эмпирических частот как комбинационной и пропорциональной суммарной площади двух замкнутых элементарных участков сети термов не должна вызывать удивления. С одной стороны, появление комбинационных частот в процедуре обработки данных по программе безусловной локальной минимизации вполне естественно. Ведь работающий по программе безусловной минимизации компьютер — это своего рода математический самонастраивающийся резонатор, который резонирует не только на основных частотах, но и на гармониках и комбинационных частотах: по истечении некоторого достаточно большого промежутка времени он автоматически настраивается на заданное заранее число произвольных частот (4 для рассматриваемой линии), которые случайно могут оказаться и не основными резонансными. В техническом отношении такой математический резонатор значительно более сложное устройство, чем привычные в физике звуковые, радиочастотные или оптические резонаторы. С другой стороны, было бы ошибкой считать появление комбинационных частот чисто «приборным» эффектом, т. е. результатом неудачной методики обработки данных. Ведь существование комбинационных частот предсказывается, и вполне естественным образом; при априорном рассмотрении многоуровневых квазимолекулярных моделей, обобщающих известную модель Розенталя—Бобашева на случай, скажем, сетей лестничного типа. Так что в этом плане функция возбуждения линии 4416 \AA в системе $\text{H}^+ + \text{Cd}$ несомненно преподносит своего рода сюрприз, и это помимо самого по себе удивительного и приятного факта периодичности и регулярности ее колебательной структуры!

Список литературы

- [1] Dworetzky S. H., Novick R., Smith W. W., Tolk N. // V ICPEAC. Abstracts [of Papers. Leningrad, 1967. P. 280—282.
- [2] Dworetzky S. H., Novick R., Smith W. W., Tolk N. // Phys. Rev. Lett. 1967. Vol. 18. N 22. P. 939—941.
- [3] Бобашев С. В. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т. 11. Вып. 8. С. 389—391.
- [4] Rosenthal H. // Phys. Rev. 1971. Vol. A4. N 3. P. 1030—1042.
- [5] Анкудинов В. А., Бобашев С. В., Перель В. И. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. Вып. 3. С. 906—919.
- [6] Завилоццо А. Н., Запесочный П. П., Панев Г. С. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1973. Т. 18. Вып. 7. С. 417—420.
- [7] Grouard J. P., Montmagnon J. L. // J. Phys. 1980. Vol. B13. P. L211—L214.
- [8] Grouard J. P., Montmagnon J. L. // J. Phys. 1983. Vol. B 16. N 8. P. 1393—1408.

- [9] Демков Ю. Н. // Вопросы теории атомных столкновений. Вып. 3. 1986. С. 195—215.
- [10] Ципле М. Ю., Овчинников В. Л., Шпених О. Б. // Элементарные процессы при атомных столкновениях. Чебоксары, 1984. С. 36—48.
- [11] Островский В. Н., Харченко В. А. // ЖТФ. 1978. Т. 48. Вып. 4. С. 664—670.
- [12] ЭВМ «Электроника 100/И». Эксплуатационная документация. Кн. 26. Калининград, 1977. 67 с.
- [13] Осетинский Л. Г., Осетинский М. Г., Писаревский А. Н. ФОКАЛ для микро- и мини-компьютеров. Л.: Машиностроение, 1988. 302 с.

Ужгородский
государственный университет

Поступило в Редакцию
26 сентября 1990 г.